

Федеральное государственное бюджетное образовательное
учреждение высшего профессионального образования
«Санкт-Петербургский государственный университет»

Институт химии

Н. А. Бокач, В. П. Боярский, С. А. Мильцов,
П. М. Толстой, Т. Г. Чулкова

Теоретические основы органической химии

Справочные таблицы

Санкт-Петербург
ВВМ
2016

УДК 547.1'1:544.47(075)

ББК 24.237: 24.54–74.58

Б86

*Утверждено Ученым советом Института химии СПбГУ
в качестве учебного пособия для студентов 4–го и 5–го курсов*

Рецензенты:

д.х.н., проф. кафедры химии

Санкт-Петербургского государственного
лесотехнического университета

Д. А. Пономарев

к.х.н., доцент, доц. кафедры органической химии

Института химии СПбГУ

П. С. Лобанов

Авторы: Н. А. Бокач, В. П. Боярский, С. А. Мильцов, П. М. Толстой,
Т. Г. Чулкова

Бокач Н. А., Боярский В. П., Мильцов С. А.

Б86 Теоретические основы органической химии. Справочные таблицы: учебно–методическое пособие / Н. А. Бокач, В. П. Боярский, С. А. Мильцов, П. М. Толстой, Т. Г. Чулкова—СПб.: Изд-во ВВМ, 2016.— 35 с.

ISBN 978-5-9651-0962-3

В справочных таблицах к курсу «Теоретические основы органической химии» собраны данные по свойствам и характеристикам некоторых органических соединений. Настоящее учебно–методическое пособие поможет студентам в решении задач по курсу «Теоретические основы органической химии».

Предназначено для самостоятельной работы студентов.

УДК 547.1'1:544.47(075)

ББК 24.237: 24.54–74.58

ISBN 978-5-9651-0962-3

© Авторы, 2016

Содержание

Таблица 1. Дипольные моменты органических молекул	4
Таблица 2. Константы спин–спинового взаимодействия для некоторых органических соединений	23
Таблица 3. Константы кислотности и основности некоторых органических соединений	25
Таблица 4. Кислотность воды и спиртов в газовой фазе	28
Таблица 5. σ_m , σ_p , σ_p^+ , σ_p^- — константы заместителей	29
Таблица 6. Свойства некоторых растворителей	33
Таблица 7. Данные ^1H ЯМР. Химические сдвиги наиболее часто используемых растворителей.	35

Таблица 1. Дипольные моменты органических молекул

Формула	Название	μ , Д
CCl_2F_2	Дифтордихлорметан (фреон–12)	0.51
CCl_3F	Фтортрихлорметан (фреон–11)	0.45
CCl_3NO_2	Нитро(трихлор)метан (хлорпикрин)	1.18
CHBr_3	Бромформ (трибромметан)	0.99
CHClF_2	Дифторхлорметан	1.41
CHCl_2F	Фтордихлорметан	1.29
CHCl_3	Хлороформ	1.06
CHF_3	Фтороформ (фреон–23)	1.6
CHI_3	Иодоформ (трийодметан)	0.99
CH_2Br_2	Дибромметан (бромистый метилен)	1.91
CH_2Cl_2	Дихлорметан (хлористый метилен)	1.62
CH_2I_2	Диiodметан (иодистый метилен)	1.10
CH_2N_2	Цианамид	3.8
CH_2O	Муравьиный альдегид (формальдегид)	2.27
CH_2O_2	Муравьиная кислота	1.4
CH_3Br	Бромметан	1.79
CH_3Cl	Хлорметан	1.86
CH_3F	Фторметан	1.81
CH_3I	Иодметан	1.64
CH_3NO	Формамид (амид муравьиной кислоты)	3.22
CH_3NO_2	Нитрометан	3.54
CH_3NO_3	Метилнитрат	2.85
CH_4	Метан	0
CH_4O	Метанол (метиловый спирт)	1.706

Формула	Название	μ, D
CH_5N	Метанамин (метиламин)	1.32
CH_6N_2	Метилгидразин	1.7
C_2HCl_3	Трихлорэтилен	0.94
C_2HCl_5	Пентахлорэтан	0.092
C_2H_2	Ацетилен	0
$\text{C}_2\text{H}_2\text{Br}_2$	(E)-1,2-Дибромэтилен	0
$\text{C}_2\text{H}_2\text{Br}_2$	(Z)-1,2-Дибромэтилен	1.35
$\text{C}_2\text{H}_2\text{ClI}$	(E)-1-Иод-2-хлорэтилен	1.27
$\text{C}_2\text{H}_2\text{ClI}$	(Z)-1-Иод-2-хлорэтилен	0.57
$\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$	1,1-Дихлорэтилен	1.30
$\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$	(E)-1,2-Дихлорэтилен	0.70
$\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_2$	(Z)-1,2-Дихлорэтилен	2.95
$\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_4$	1,1,1,2-Тетрахлорэтан	1.2
$\text{C}_2\text{H}_2\text{Cl}_4$	1,1,2,2-Тетрахлорэтан	1.36
$\text{C}_2\text{H}_2\text{I}_2$	(E)-1,2-Диiodэтилен	0
$\text{C}_2\text{H}_2\text{I}_2$	(Z)-1,2-Диiodэтилен	0.75
$\text{C}_2\text{H}_3\text{Br}$	Бромэтилен	1.41
$\text{C}_2\text{H}_3\text{BrO}$	Ацетилбромид	2.43
$\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}$	Хлорэтилен	1.44
$\text{C}_2\text{H}_3\text{ClO}$	Ацетилхлорид	2.68
$\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3$	1,1,1-Трихлорэтан	1.77
$\text{C}_2\text{H}_3\text{Cl}_3$	1,1,2-Трихлорэтан	1.25
$\text{C}_2\text{H}_3\text{I}$	Иодэтилен	1.26
$\text{C}_2\text{H}_3\text{N}$	Ацетонитрил	3.94
$\text{C}_2\text{H}_3\text{NS}$	Метилизотиоцианат	3.18
$\text{C}_2\text{H}_3\text{NS}$	Метилтиоцианат	3.16
C_2H_4	Этилен	0
$\text{C}_2\text{H}_4\text{BrCl}$	1-Бром-2-хлорэтан	1.09
$\text{C}_2\text{H}_4\text{Br}_2$	1,1-Дибромэтан (бромистый этилиден)	2.12

Формула	Название	μ, D
$C_2H_4Br_2$	1,2-Дибромэтан	0.94
$C_2H_4Cl_2$	1,1-Дихлорэтан (хлористый этилиден)	2.04
$C_2H_4Cl_2$	1,2-Дихлорэтан	1.27–1.57
$C_2H_4F_2$	1,1-Дифторэтан (фтористый этилиден)	2.24
$C_2H_4I_2$	1,1-Диодэтан (иодистый этилиден)	2.24
$C_2H_4I_2$	1,2-Диодэтан	1.3
C_2H_4O	Ацетальдегид (уксусный альдегид)	2.69
C_2H_4O	Оксиран (окись этилена)	1.88
$C_2H_4O_2$	Уксусная кислота	1.70
C_2H_5Br	Бромэтан	2.01
C_2H_5Cl	Хлорэтан	2.0
C_2H_5ClO	Метокси(хлор)метан	2.03
C_2H_5ClO	2-Хлорэтанол (этиленхлоргидрин)	1.74
C_2H_5F	Фторэтан	1.92
C_2H_5I	Иодэтан	1.87
C_2H_5NO	Ацетамид	3.6
$C_2H_5NO_2$	Нитроэтан	3.58
$C_2H_5NO_2$	Этилнитрит	2.38
$C_2H_5NO_3$	Этилнитрат	2.91
C_2H_6O	Диметиловый эфир	1.29
C_2H_6O	Этанол (этиловый спирт)	1.68
$C_2H_6O_2$	Этиленгликоль	2.2
C_2H_6S	Этантиол (этилмеркаптан)	1.56
C_2H_7N	<i>N</i> -Метилметанамин (диметиламин)	1.02
C_2H_7N	Этанамин (этиламин)	0.99
$C_2H_8N_2$	Этан-1,2-диамин (этилендиамин)	1.94
C_3H_5Br	1-Бромпроп-1-ен	1.79
C_3H_5BrO	Бромацетон	2.38
C_3H_5Cl	1-Хлорпроп-1-ен	1.98

Формула	Название	μ, D
C_3H_5ClO	Хлорацетон	~ 2.2
C_3H_5ClO	2-(Хлорметил)оксиран (эпихлоргидрин)	1.8
C_3H_5N	Пропионитрил	4.03
C_3H_5NS	Этилизоотиоцианат	3.31
C_3H_5NS	Этилтиоцианат	3.64
C_3H_6	Пропен (пропилен)	0.35
$C_3H_6Br_2$	1,2-Дибромпропан	1.13–1.36
$C_3H_6Br_2$	1,3-Дибромпропан	2.15
$C_3H_6Cl_2$	1,1-Дихлорпропан	2.06
$C_3H_6Cl_2$	1,2-Дихлорпропан	1.46–1.68
$C_3H_6Cl_2$	1,3-Дихлорпропан	2.07
$C_3H_6Cl_2$	2,2-Дихлорпропан	2.63
C_3H_6O	Ацетон	2.85
C_3H_6O	2-Метилоксиран (α -окись пропилена)	1.88
C_3H_6O	Оксетан (окись триметилена)	2.01
C_3H_6O	Пропаналь (пропионовый альдегид)	2.73
$C_3H_6O_2$	Метилацетат	1.72
$C_3H_6O_2$	Пропионовая кислота	1.74
$C_3H_6O_2$	Этилформиат	1.92
C_3H_7Br	1-Бромпропан	2.01
C_3H_7Br	2-Бромпропан	2.19
C_3H_7Cl	1-Хлорпропан	2.04
C_3H_7Cl	2-Хлорпропан	2.15
$C_3H_7NO_2$	Пропилнитрит	2.28
$C_3H_7NO_3$	Пропилнитрат	2.98
C_3H_8O	Пропан-1-ол	1.64
C_3H_8O	Пропан-2-ол	1.68
C_3H_9N	<i>N,N</i> -Диметилметанамин (триметиламин)	0.65
C_4H_4O	Фуран	0.72

Формула	Название	μ, D
C_4H_4S	Тиофен	0.55
C_4H_5N	Пиррол	1.8
$C_4H_6N_2O_2$	Этилдиазоацетат	2.03
C_4H_6O	(<i>E</i>)-Бут-2-еналь (кротоновый альдегид)	3.67
$C_4H_6O_3$	Уксусный ангидрид	2.8
C_4H_8	Бут-1-ен (бутилен)	0.3
C_4H_8	Бут-2-ен (псевдобутилен)	0
C_4H_8	2-Метилпропен (изобутилен)	0
$C_4H_8O_2$	1,4-Диоксан	0
$C_4H_8O_2$	Масляная кислота	0.93
$C_4H_8O_2$	Метилпропионат	1.73
$C_4H_8O_2$	Пропилформиат	1.89
$C_4H_8O_2$	Этилацетат	1.81
C_4H_9Cl	1-Хлорбутан	2.11
C_4H_{10}	Бутан	0
C_4H_{10}	Изобутан	0
$C_4H_{10}O$	Бутан-1-ол	1.63
$C_4H_{10}O$	Бутан-2-ол	1.65
$C_4H_{10}O$	Диэтиловый эфир (этиловый эфир)	1.17
$C_4H_{10}O$	2-Метилпропан-1-ол	1.63
$C_4H_{10}O$	2-Метилпропан-2-ол	1.66
$C_4H_{10}S$	Диэтилсульфид	1.51
$C_5H_4O_2$	2-Фуральдегид (фурфурол)	3.6
C_5H_5N	Пиридин	2.20
C_5H_7N	1-Метилпиррол	1.92
C_5H_8	Изопрен (2-метилбута-1,3-диен)	0.38
C_5H_8	Пента-1,3-диен	0.68
C_5H_8	Цикlopентен	0.97
C_5H_8O	Цикlopентанон	3.00

Формула	Название	μ, D
$C_5H_8O_2$	Пентан–2,4–дион (ацетилацетон)	3.00
C_5H_{10}	Пент–1–ен	0.47
$C_5H_{10}O$	Пентан–3–он (диэтилкетон)	2.72
$C_5H_{10}O_2$	Бутилформиат	1.8
$C_5H_{10}O_2$	Изобутилформиат	1.88
$C_5H_{10}O_2$	Изопропилацетат	1.85
$C_5H_{10}O_2$	3–Метилбутановая кислота (изовалериановая кислота)	0.89
$C_5H_{10}O_2$	Метилбутират	1.71
$C_5H_{10}O_2$	Пропилацетат	1.78
$C_5H_{10}O_2$	Этилпропионат	1.74
$C_5H_{11}NO_2$	Пентилнитрит	2.27
$C_5H_{12}N_2S$	1,3–Диэтилтиомочевина	4.9
$C_5H_{12}O$	2–Метилбутан–2–ол (<i>трет</i> –амиловый спирт)	1.66
$C_5H_{12}O$	3–Метилбутан–1–ол (изоамиловый спирт)	1.85
$C_5H_{12}O$	Пентан–1–ол (амиловый спирт)	1.65
$C_5H_{12}O_4$	Пентаэритрит	~2
$C_6H_2Br_4$	1,2,4,6–Тетрабромбензол	0.7
$C_6H_2Cl_4$	1,2,3,4–Тетрахлорбензол	1.90
$C_6H_2Cl_4$	1,2,4,6–Тетрахлорбензол	0.65
$C_6H_3Br_3$	1,3,5–Трибромбензол	0.28
$C_6H_3Br_3O$	2,4,6–Трибромфенол	1.56
$C_6H_3Cl_3$	1,2,3–Трихлорбензол	2.31
$C_6H_3Cl_3$	1,2,4–Трихлорбензол	1.25
$C_6H_3Cl_3$	1,3,5–Трихлорбензол	0
$C_6H_3Cl_3O$	2,4,6–Трихлорфенол	1.62
$C_6H_3I_3$	1,3,5–Трииодбензол	0.24
$C_6H_3N_3O_6$	1,3,5–Тринитробензол	0.7
$C_6H_4BrNO_2$	1–Бром–2–нитробензол	4.20
$C_6H_4BrNO_2$	1–Бром–3–нитробензол	3.41

Формула	Название	μ, D
$C_6H_4BrNO_2$	1-Бром-4-нитробензол	2.65
$C_6H_4Br_2$	1,2-Дибромбензол	2.0
$C_6H_4Br_2$	1,3-Дибромбензол	1.5
$C_6H_4Br_2$	1,4-Дибромбензол	0
$C_6H_4ClNO_2$	1-Нитро-2-хлорбензол	4.59
$C_6H_4ClNO_2$	1-Нитро-3-хлорбензол	3.69
$C_6H_4ClNO_2$	1-Нитро-4-хлорбензол	2.78
$C_6H_4Cl_2$	1,2-Дихлорбензол	2.16
$C_6H_4Cl_2$	1,3-Дихлорбензол	1.48
$C_6H_4Cl_2$	1,4-Дихлорбензол	0
$C_6H_4F_2$	1,2-Дифторбензол	2.38
$C_6H_4F_2$	1,3-Дифторбензол	1.58
$C_6H_4INO_2$	1-Иод-2-нитробензол	3.92
$C_6H_4INO_2$	1-Иод-3-нитробензол	3.43
$C_6H_4INO_2$	1-Иод-4-нитробензол	3.05
$C_6H_4I_2$	1,2-Диидбензол	1.69
$C_6H_4I_2$	1,3-Диидбензол	1.27
$C_6H_4I_2$	1,4-Диидбензол	0.19
$C_6H_4N_2O_4$	1,2-Динитробензол	6.00
$C_6H_4N_2O_4$	1,3-Динитробензол	3.70
$C_6H_4N_2O_4$	1,4-Динитробензол	0.8
$C_6H_4O_2$	Бензо-1,2-хинон (<i>о</i> -хинон)	5.1
$C_6H_4O_2$	Бензо-1,4-хинон (<i>п</i> -хинон)	0
C_6H_5Br	Бромбензол	1.77
C_6H_5BrO	2-Бромфенол	1.36
C_6H_5BrO	4-Бромфенол	2.12
C_6H_5Cl	Хлорбензол	1.69
C_6H_5ClO	2-Хлорфенол	1.31
C_6H_5ClO	3-Хлорфенол	2.10

Формула	Название	μ, D
C_6H_5ClO	4-Хлорфенол	2.22
$C_6H_5Cl_2N$	2,5-Дихлоранилин	1.68
C_6H_5F	Фторбензол	1.57
C_6H_5I	Иодбензол	1.40
$C_6H_5NO_2$	Нитробензол	4.23
$C_6H_5NO_3$	2-Нитрофенол	3.10
$C_6H_5NO_3$	3-Нитрофенол	3.90
$C_6H_5NO_3$	4-Нитрофенол	5.05
C_6H_6	Бензол	0
C_6H_6ClN	2-Хлоранилин	1.77
C_6H_6ClN	3-Хлоранилин	2.66
C_6H_6ClN	4-Хлоранилин	2.97
$C_6H_6N_2O_2$	2-Нитроанилин	4.96
$C_6H_6N_2O_2$	3-Нитроанилин	4.85
$C_6H_6N_2O_2$	4-Нитроанилин	6.17
C_6H_6O	Фенол	1.40
$C_6H_6O_2$	Гидрохинон	0
$C_6H_6O_2$	Пирокатехин	2.62
C_6H_6S	Бензолтиол (тиофенол)	1.33
C_6H_7N	Анилин	1.48
C_6H_7N	2-Метилпиридин	1.72
C_6H_7N	3-Метилпиридин	2.30
C_6H_7N	4-Метилпиридин	2.54
$C_6H_8N_2$	Бензол-1,2-диамин (<i>о</i> -фенилендиамин)	1.5
$C_6H_8N_2$	Бензол-1,3-диамин (<i>м</i> -фенилендиамин)	1.70
$C_6H_8N_2$	Бензол-1,4-диамин (<i>п</i> -фенилендиамин)	1.46
$C_6H_8N_2$	Фенилгидразин	1.7
C_6H_{10}	2,3-Диметилбута-1,3-диен	0
C_6H_{10}	2-Метилпента-1,3-диен	0.65

Формула	Название	μ, D
C_6H_{10}	3–Метилпента–1,3–диен	0.63
C_6H_{10}	4–Метилпента–1,3–диен	0.52
$C_6H_{10}O$	4–Метилпент–3–ен–2–он (окись мезитила)	2.84
$C_6H_{10}O$	Циклогексанон	2.9
$C_6H_{10}O_3$	Этил–3–оксобутаноат (ацетоуксусный эфир)	2.95
$C_6H_{10}O_4$	Диэтилоксалат	2.49
C_6H_{12}	Циклогексан	0
$C_6H_{12}O$	Гексан–2–он (метилбутилкетон)	2.16
$C_6H_{12}O$	3,3–Диметилбутан–2–он (пинаколин)	2.79
$C_6H_{12}O$	Циклогексано́л	1.9
$C_6H_{12}O_2$	Бутилацетат	1.83
$C_6H_{12}O_2$	<i>трет</i> –Бутилацетат	1.91
$C_6H_{12}O_2$	Изобутилацетат	1.85
$C_6H_{12}O_2$	Метилпентаноат (метилвалерат)	1.61
$C_6H_{12}O_2$	Пентилформиат	1.90
$C_6H_{12}O_2$	Пропилпропионат	1.77
$C_6H_{12}O_2$	Этилбутират	1.74
$C_6H_{12}O_3$	2,4,6–Триметил–1,3,5–триоксан (паральдегид)	1.44
$C_6H_{13}N$	1–Метилпиперидин	0.91
$C_6H_{14}O$	Гексан–1–ол	1.64
C_7H_5BrO	Бензоилбромид	3.37
C_7H_5ClO	Бензоилхлорид	3.33
$C_7H_5Cl_3$	(Трихлорметил)бензол (бензотрихлорид)	2.07
C_7H_5N	Бензонитрил	4.39
C_7H_5NO	Изоцианатобензол (фенилизоцианат)	2.28
$C_7H_5NO_3$	2–Нитробензальдегид	4.3
$C_7H_5NO_3$	3–Нитробензальдегид	3.28
$C_7H_5NO_3$	4–Нитробензальдегид	2.4
$C_7H_5NO_4$	4–Нитробензойная кислота	3.5

Формула	Название	μ, D
C_7H_5NS	Изотиоцианатобензол (фенилизотиоцианат)	3.00
$C_7H_6Cl_2$	(Дихлорметил)бензол (бензальхлорид)	2.03
C_7H_6O	Бензальдегид	3.0
$C_7H_6O_2$	Бензойная кислота	1.0
C_7H_7Cl	1-Метил-2-хлорбензол (<i>o</i> -хлортолуол)	1.56
C_7H_7Cl	1-Метил-3-хлорбензол (<i>m</i> -хлортолуол)	1.8
C_7H_7Cl	1-Метил-4-хлорбензол (<i>n</i> -хлортолуол)	2.19
C_7H_7Cl	(Хлорметил)бензол (хлористый бензил)	1.85
C_7H_7NO	Бензамид (амид бензойной кислоты)	3.6
$C_7H_7NO_2$	1-Метил-2-нитробензол (<i>o</i> -нитротолуол)	3.66
$C_7H_7NO_2$	1-Метил-3-нитробензол (<i>m</i> -нитротолуол)	4.17
$C_7H_7NO_2$	1-Метил-4-нитробензол (<i>n</i> -нитротолуол)	4.44
$C_7H_7NO_3$	1-Метокси-2-нитробензол (<i>o</i> -нитроанизол)	4.83
$C_7H_7NO_3$	1-Метокси-3-нитробензол (<i>m</i> -нитроанизол)	3.86
$C_7H_7NO_3$	1-Метокси-4-нитробензол (<i>n</i> -нитроанизол)	4.74
C_7H_8	Толуол	0.37
C_7H_8O	Анизол (метоксибензол)	1.35
C_7H_8O	<i>o</i> -Крезол	1.41
C_7H_8O	<i>m</i> -Крезол	1.54
C_7H_8O	<i>n</i> -Крезол	1.57
C_7H_8O	Фенилметанол (бензиловый спирт)	1.71
C_7H_9N	2,3-Лутидин	2.20
C_7H_9N	2,4-Лутидин	2.30
C_7H_9N	2,5-Лутидин	2.14; 2.15
C_7H_9N	2,6-Лутидин	1.65; 1.87; 1.66
C_7H_9N	3,4-Лутидин	2.85
C_7H_9N	3,5-Лутидин	2.58

Формула	Название	μ, D
C_7H_9N	<i>N</i> -Метиланилин	1.61
C_7H_9N	<i>o</i> -Толуидин	1.58
C_7H_9N	<i>m</i> -Толуидин	1.43
C_7H_9N	<i>p</i> -Толуидин	1.27
C_7H_9NO	2-Метоксианилин	1.62
C_7H_9NO	4-Метоксианилин	1.80
$C_7H_{12}O$	Циклогептанон	3.04
$C_7H_{14}O$	2-Метилциклогексанол	1.95
$C_7H_{14}O$	3-Метилциклогексанол	1.9
$C_7H_{14}O$	4-Метилциклогексанол	1.9
C_8H_7N	Индол	2.05
C_8H_7N	Фенилацетонитрил (бензилцианид)	3.47
C_8H_8	Стирол	<0.2
C_8H_8O	Ацетофенон	3.00
C_8H_{10}	Этилбензол	0.59
C_8H_{10}	<i>o</i> -Ксилол	0.62
C_8H_{10}	<i>m</i> -Ксилол	0.34
C_8H_{10}	<i>p</i> -Ксилол	0
$C_8H_{10}BrN$	4-Бром- <i>N,N</i> -диметиланилин	3.37
$C_8H_{10}ClN$	<i>N,N</i> -Диметил-4-хлоранилин	3.29
$C_8H_{10}N_2O_2$	<i>N,N</i> -Диметил-4-нитроанилин	6.87
$C_8H_{10}O_2$	1,2-Диметоксибензол (вератрол)	1.38
$C_8H_{10}O_2$	1,3-Диметоксибензол (диметиловый эфир резорцина)	1.59
$C_8H_{10}O_2$	1,4-Диметоксибензол (диметиловый эфир гидрохинона)	1.81
$C_8H_{11}N$	<i>N,N</i> -Диметиланилин	1.58
$C_8H_{11}N$	2,4,6-Триметилпиридин (γ -коллидин)	1.93
$C_8H_{11}N$	<i>N</i> -Этиланилин	1.68
$C_8H_{12}O_4$	Диэтилмалеат	2.55

Формула	Название	μ, D
$C_8H_{12}O_4$	Диэтилфумарат	2.39
$C_8H_{14}O_4$	Диэтилсукцинат	2.3
C_9H_7N	Изохинолин	2.54
C_9H_7N	Хинолин	2.16
C_9H_8O	(2 <i>E</i>)-3-Фенилакрилальдегид (коричный альдегид)	3.63
$C_9H_8O_2$	Коричная кислота	1.78
$C_9H_{10}O_2$	Бензилацетат	1.8
$C_9H_{10}O_2$	(2-Метилфенил)ацетат (<i>o</i> -крезилацетат)	1.68
$C_9H_{10}O_2$	(3-Метилфенил)ацетат (<i>m</i> -крезилацетат)	1.60
$C_9H_{10}O_2$	(4-Метилфенил)ацетат (<i>n</i> -крезилацетат)	1.53
$C_9H_{10}O_2$	Этилбензоат	1.95
C_9H_{12}	Мезитилен (1,3,5-триметилбензол)	0.2
$C_9H_{14}O$	2,6-Диметилгепта-2,6-диен-4-он (форон)	2.36
$C_9H_{14}O$	3,5,5-Триметилциклогекс-2-ен-1-он (изофорон)	3.96
$C_{10}H_6Cl_2$	1,2-Дихлорнафталин	2.47
$C_{10}H_6Cl_2$	1,3-Дихлорнафталин	1.78
$C_{10}H_6Cl_2$	1,4-Дихлорнафталин	0.50
$C_{10}H_6Cl_2$	1,5-Дихлорнафталин	0
$C_{10}H_6Cl_2$	1,6-Дихлорнафталин	1.44
$C_{10}H_6Cl_2$	1,7-Дихлорнафталин	2.55
$C_{10}H_6Cl_2$	1,8-Дихлорнафталин	2.82
$C_{10}H_6Cl_2$	2,3-Дихлорнафталин	2.55
$C_{10}H_6Cl_2$	2,6-Дихлорнафталин	0
$C_{10}H_6Cl_2$	2,7-Дихлорнафталин	1.53
$C_{10}H_7Cl$	1-Хлорнафталин	1.50
$C_{10}H_7Cl$	2-Хлорнафталин	1.65
$C_{10}H_7F$	1-Фторнафталин	1.42
$C_{10}H_7F$	2-Фторнафталин	1.49

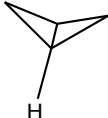
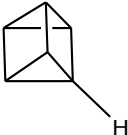
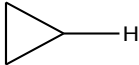
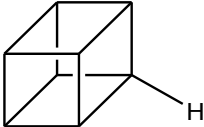
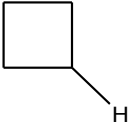
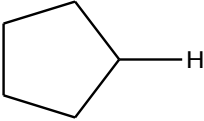
Формула	Название	μ, D
$C_{10}H_7NO_2$	1–Нитрозо–2–нафтол	4.39
$C_{10}H_7NO_2$	2–Нитрозо–1–нафтол	4.36
$C_{10}H_7NO_2$	1–Нитронафталин	3.68
$C_{10}H_7NO_2$	2–Нитронафталин	4.4
$C_{10}H_8$	Нафталин	0
$C_{10}H_8O$	1–Нафтол	1.0
$C_{10}H_8O$	2–Нафтол	1.3
$C_{10}H_{10}O_4$	Диметилтерефталат	2.2
$C_{10}H_{10}O_4$	Диметилфталат	2.8
$C_{10}H_{12}$	1,2,3,4–Тетрагидронафталин (тетралин)	0.52
$C_{10}H_{14}O_2$	1,2–Диэтоксibenзол (диэтиловый эфир пирокатехина)	1.37
$C_{10}H_{14}O_2$	1,3–Диэтоксibenзол (диэтиловый эфир резорцина)	1.7
$C_{10}H_{14}O_2$	1,4–Диэтоксibenзол (диэтиловый эфир гидрохинона)	1.7
$C_{12}H_8O$	Дибензо[<i>b,d</i>]фуран (окись дифенилена)	0.88
$C_{12}H_9NO_2$	2–Нитробифенил	3.79
$C_{12}H_9NO_2$	3–Нитробифенил	3.90
$C_{12}H_9NO_2$	4–Нитробифенил	4.28
$C_{12}H_{10}O$	Дифениловый эфир	1.14
$C_{12}H_{10}S$	Дифенилсульфид	1.50
$C_{12}H_{10}S_2$	Дифенилдисульфид	1.81
$C_{12}H_{11}N$	<i>N</i> –Фениланилин (дифениламин)	1.3
$C_{12}H_{12}N_2$	1,1–Дифенилгидразин	1.87
$C_{12}H_{12}N_2$	1,2–Дифенилгидразин (гидразобензол)	1.79
$C_{12}H_{14}O_4$	Диэтилтерефталат	2.3
$C_{12}H_{14}O_4$	Диэтилфталат	2.4
$C_{12}H_{22}O_2$	(2–Изопропил–5–метилциклогексил)ацетат (ментилацетат)	1.83

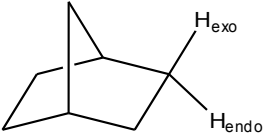
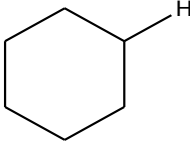



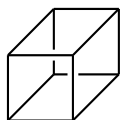
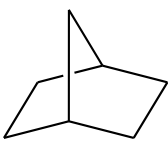
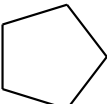
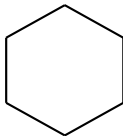
Формула	Название	μ, D
$C_{13}H_8O$	Флуорен-9-он	3.3
$C_{13}H_9Cl$	9-Хлорфлуорен	1.76
$C_{13}H_9N$	Акридин	1.95
$C_{13}H_{10}$	Флуорен	0.28
$C_{13}H_{10}O$	Бензофенон (дифенилкетон)	2.5
$C_{13}H_{10}O_3$	Фенил-2-гидроксибензоат (салол, фенилсалицилат)	3.15
$C_{13}H_{12}N_2O$	1,3-Дифенилмочевина	4.6
$C_{13}H_{12}N_2S$	1,3-Дифенилтиомочевина	4.85
$C_{14}H_{12}O$	2,3-Дифенилоксиран (окись 1,2-дифенилэтилена)	1.73
$C_{14}H_{12}O_2$	2-Гидрокси-1,2-дифенилэтанон (бензоин)	3.57
$C_{14}H_{14}$	1,1'-Этан-1,2-диилдобензол (добензил)	0
$C_{14}H_{14}O$	Дибензиловый эфир	1.38
$C_{15}H_{14}O$	1,3-Дифенилацетон (добензилкетон)	2.65
$C_{15}H_{14}O_3$	Бис(4-метоксифенил)метанон (ди- <i>n</i> -анизилкетон)	3.90
$C_{18}H_{15}N$	<i>N,N</i> -Дифениланилин (трифениламин)	0.26
$C_{19}H_{16}$	Трифенилметан	0

Литература:

1. CRC Handbook of Chemistry and Physics, 95th Edition, Ed. by William M. Hayes. CRC Press. **2014**.
2. E. Klingsberg. The Chemistry of Heterocyclic Compounds, Pyridine and Its Derivatives. Interscience Publishers. Inc., New-York. Interscience Publishers Ltd., London. **1961**.

Таблица 2. Константы спин–спинового взаимодействия для некоторых органических соединений

Соединение	$^1J_{\text{CH}}$, Гц
	202 [1]
	180 [2]
	161 [2]
	153.8 [2]
	136 [2]
	131 [2]

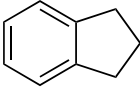
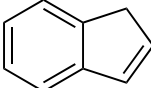
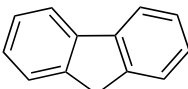
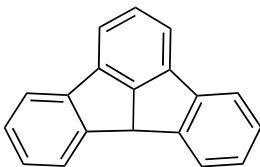

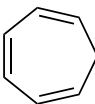
Соединение	$^1J_{\text{CH}}, \text{ Гц}$
	131 (эндо) 128.9 (экзо) [3]
	127 [2]
	-14.8 (мостик) 22.3 [4]
	12.4 [5]
	28.4 [6] 29.1 [7]
	31.7 [4]
	32.5 33.4 [8]
	32.6 [9]
	33.1 [10]

Литература:

1. F.J. McQuillin, M.S. Baird, «Alicyclic Chemistry», Cambridge Texts in Chemistry and Biochemistry, **1983**.
2. E. Breitmaier, W. Voelter, «Carbon C13 NMR Spectroscopy». 3rd Ed., VCH **1990**; G.S. Handler, H. Anderson, *Tetrahedron* **1958**, 2, 345; J.J. Burke, P.C. Lauterbur, *J. Amer. Chem. Soc.* **1964**, 86, 1870; <http://www.chem.wisc.edu/areas/reich/nmr/06-cmr-05-1jch.htm>
3. N.M. Sergeev. *NMR: Basic Princ. Prog.* **1990**, 22, 31; R. Aydin et al., *Megn. Reson. Chem.* **1990**, 28, 448.
4. L.B. Krivdin et al. *Ann. Rep. NMR Spectr.* **2007**, 61, 133–248.
5. P.C. Lauterbur, *JCP* **1965**, 43, 360.
6. M. Stoecker et al., *Org. Magn. Reson.* **1979**, 12, 107.
7. T. Buntgaard et al., *J. Magn. Reson.* **1975**, 19, 345.
8. G.W.H. Cheeseman et al., *Org. Magn. Reson.* **1979**, 12, 212.
9. F. J. Weigert et al., *J. Amer. Chem. Soc.* **1972**, 94, 6021.
10. H. Guenter et al., *Heterocycles* **1978**, 11, 337.

Таблица 3. Константы кислотности и основности некоторых органических соединений

Соединение	pKa в воде (T=25°C)
HCOOH	3.77 [1]
CH ₃ COOH	4.76 [2]
CH ₂ ClCOOH	2.86 [1]
CHCl ₂ COOH	1.26 [2]
CCl ₃ COOH	0.65 [1]
CF ₃ COOH	-0.25 [1]
PhCOOH	4.20 [2]
CH ₃ OH	15.5 [2]
CH ₃ CH ₂ OH	15.9 [2]
CH ₃ CH ₂ CH ₂ OH	16.1 [3]
(CH ₃) ₂ CHOH	17.0 [2] (16.6) [3]
CH ₃ CH ₂ CH ₂ CH ₂ OH	16.1 [3]
(CH ₃) ₂ CHCH ₂ OH	16.1 [3]
(CH ₃) ₃ COH	18.0 [2] (16.9) [3]
CF ₃ CH ₂ OH	12.4 [2]
C ₆ H ₅ OH	10.0 [2]
<i>o</i> -NO ₂ C ₆ H ₄ OH	7.23 [4]
<i>m</i> -NO ₂ C ₆ H ₄ OH	8.35 [4]
<i>p</i> -NO ₂ C ₆ H ₄ OH	7.14 [4]
2,4-(NO ₂) ₂ C ₆ H ₃ OH	3.96 [4]
2,4,6-(NO ₂) ₃ C ₆ H ₂ OH	0.38 [5]
CH ₄	48 [1]
Me ₂ CH ₂	51 [1]
Me ₃ CH	53 [1]
CH ₂ =CH ₂	50 [1]
CH≡CH	24 [1]

$\text{PhC}\equiv\text{CH}$	23 [1]
$\text{EtCO}_2\text{CH}_2\text{COMe}$	14.2 [1]
$\text{EtCO}_2\text{CH}_2\text{CO}_2\text{Et}$	16.4 [1]
$\text{MeCOCH}_2\text{COMe}$	13.3 [1]
$\text{MeCOCH}(\text{Me})\text{COMe}$	15.1 [1]
C_6H_6	43 [1]
PhCH_3	41 [1]
Ph_2CH_2	33.5 [1]
Ph_3CH	31.5 [1]
 индан	ca. 50 [1]
 инден	20 [1]
 флуорен	22.6 [1]
 флуораден	11.0 [6]
 циклопентадиен	16.0 [2]
 циклогептатриен	36.0 [7]

Соединение	pK _b в воде (T=25°C)
NH ₃	9.21 [8]
MeNH ₂	10.62 [8]
EtNH ₂	10.63 [8]
<i>n</i> PrNH ₂	10.53 [8]
<i>i</i> PrNH ₂	10.63 [8]
<i>n</i> BuNH ₂	10.59 [8]
<i>t</i> BuNH ₂	10.55 [8]
Me ₂ NH	10.64 [8]
(<i>n</i> Pr) ₂ NH	11.00 [8]
(<i>n</i> Bu) ₂ NH	11.25 [8]
Me ₃ N	9.76 [8]
PhNH ₂	4.25 [1]
PhN(Me) ₂	5.20 [1]
Ph ₂ NH	0.78 [1]
MeC(=O)NH ₂	-0.5 [8]
NH ₂ C(=NH)NH ₂	13.6 [8]
	pK _b в ДМСО (T=25°C)
MeC(=NH)NH ₂	27.1 [1]
NH ₂ C(=NH)NH ₂	28.5 [1]

Литература:

1. F. G. Bordwell, *Acc. Chem. Res.* **1988**, 21, 456, 463 и <http://www.chem.wisc.edu/areas/reich/pkatable/>
2. О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин, *Органическая химия*, М: Бином, **2012**.
3. Y. Nakagawa, K. Uehara, N. Mizuno, *Inorg. Chem.*, **2005**, 44, 9068.
4. M.M. Fickling, A. Fisher, B.R. Mann, J. Packer, J. Vaughan, *J. Am. Chem. Soc.*, **1959**, 81, 4226.
5. C.M. Lagier, A.C. Olivieri, C. Alejandro C.; R.K. Harris, *J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2*, **1998**, 1791.
6. H. Rapoport, G. Smolinsky, *J. Amer. Chem. Soc.*, **1960**, 82, 934.
7. R. Breslow, W. Chu, *J. Amer. Chem. Soc.*, **1973**, 95, 411.
8. H.K. Hall, *J. Am. Chem. Soc.*, **1957**, 79, 5441.

Таблица 4. Кислотность воды и спиртов в газовой фазе

Соединение	ΔG_{acid} , ккал/моль (газовая фаза)
НОН	281
CH ₃ ОН	273
CH ₃ CH ₂ ОН	271
(CH ₃) ₂ СНОН	269
(CH ₃) ₃ СОН	268

Литература:

1. О.А. Реутов, А.Л. Курц, К.П. Бутин, Органическая химия, М: Бином, 2012.

Таблица 5. σ_m , σ_p , σ_p^+ , σ_p^- – константы заместителей

Заместитель	σ_m	σ_p	σ_p^+	σ_p^-
1-азиридирил	-0.07	-0.22		
2-азиридирил	-0.06	-0.10		
As(CH ₂ CH ₃) ₂	0.22	0.00		0.08
As(C ₆ H ₅) ₂	0.03	0.09		0.29
As(O)(CH ₂ CH ₃) ₂	0.57	0.44		
As(O)(C ₆ H ₅) ₂	0.54	0.64		
AsO ₃ H ⁻	0.00	-0.02		0.46
As(S)(CH ₂ CH ₃) ₂	0.52	0.44		
BF ₂	0.32	0.48		
B(OH) ₂	-0.01	0.12	0.38	
B(OH) ₃ ⁻	-0.48	-0.44		
Br	0.39	0.23	0.15	0.25
CBr ₃	0.28	0.29		
C(CH ₃) ₃	-0.10	-0.20	-0.26	-0.13
CCl ₃	0.40	0.46		
C ₆ Cl ₅	0.25	0.24		
CF ₃	0.43	0.54	0.61	0.65
C ₆ F ₅	0.26	0.27	0.23	0.43
CF ₂ CF ₃	0.47	0.52		
CH ₃	-0.07	-0.17	-0.31	-0.17
CHBr ₂	0.31	0.32		
CH ₂ Br	0.12	0.14	0.02	
C≡CH	0.21	0.23	0.18	0.53

Заместитель	σ_m	σ_p	σ_p^+	σ_p^-
CH_2CF_3	0.12	0.09		
$\text{CH}=\text{CH}_2$	0.06	-0.04	-0.16	
$\text{CH}(\text{C}_6\text{H}_5)_2$	-0.03	-0.05		
CH_2CH_3	-0.07	-0.15	-0.3	-0.19
$\text{CH}(\text{CH}_3)_2$	-0.04	-0.15		
$(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	-0.08	-0.16	-0.29	-0.12
C_6H_5	0.06	-0.01	-0.18	0.02
$\text{CH}=\text{CHNO}_2\text{-t}$	0.32	0.26		0.88
CHCl_2	0.31	0.32		
CH_2Cl	0.11	0.12	-0.01	
CH_2CN	0.16	0.18	0.16	0.11
CH_2CONH_2	0.06	0.07		
CHF_2	0.29	0.32		
CH_2F	0.12	0.11		
CHI_2	0.26	0.26		
CH_2I	0.10	0.11		
$\text{CH}_2\text{N}(\text{CH}_3)_3^+$	0.40	0.44		
$\text{CH}=\text{NOCH}_3$	0.37	0.30		
$\text{CH}=\text{NOH-t}$	0.22	0.10		
CH_2NH_2	-0.03	-0.11		
CH_2NH_3^+	0.59	0.53		
циклопропил	-0.07	-0.21	-0.41	-0.09
CHO	0.35	0.42	0.73	1.03
CH_2OCH_3	0.08	0.01	-0.05	
Cl	0.37	0.23	0.11	0.19
CN	0.56	0.66	0.66	1
CNBBBr_3	0.61	0.48		
CNBCl_3	0.95	0.86		

Заместитель	σ_m	σ_p	σ_p^+	σ_p^-
CNBF ₃	0.72	0.66		
C(NO ₂) ₃	0.72	0.82		
CO ₂ ⁻	-0.10	0.00	-0.02	0.31
COCH ₃	0.38	0.50		0.84
C(OCH ₃) ₃	-0.03	-0.04		
COC ₆ H ₅	0.34	0.43	0.51	0.83
COCl	0.51	0.61	0.79	1.24
COF	0.55	0.70		
CONH ₂	0.28	0.36		0.61
CONHCH ₃	0.35	0.36		
CONHC ₆ H ₅	0.23	0.41		
COOCH ₃	0.37	0.45	0.49	0.75
COOC ₆ H ₅	0.37	0.44		
COOH	0.37	0.45	0.42	0.77
CSNH ₂	0.25	0.30		
F	0.34	0.06	-0.07	-0.03
GeBr ₃	0.66	0.73		
Ge(CH ₃) ₃	0.00	0.00		
Ge(CH ₂ CH ₃) ₃	0.00	0.00		
GeCl ₃	0.71	0.79	0.57	
GeF ₃	0.85	0.97		
GeH ₃	0.00	0.01		
H	0.00	0.00	0.00	0.00
HgCF ₃	0.29	0.32		
HgCH ₃	0.43	0.10		
HgCl	0.33	0.35		
HgCN	0.28	0.34		
HgF	0.34	0.33		

Заместитель	σ_m	σ_p	σ_p^+	σ_p^-
HgOC(O)CF ₃	0.50	0.52		
HgOC(O)CH ₃	0.39	0.40		
HgSCF ₃	0.39	0.42		
I	0.35	0.18	0.14	0.27
ICl ₂	1.10	1.11		
IF ₂	0.85	0.83		
IF ₄	1.07	1.15		
IO	0.58	0.62		
IO ₂	0.68	0.78		
I(OC(O)CF ₃) ₂	1.28	1.34		
NC	0.48	0.49		
N(CH ₃) ₂	-0.16	-0.83	-1.7	-0.12
N ⁺ (CH ₃) ₃	0.88	0.82	0.41	0.77
N(CH ₂ CH ₃) ₂	-0.23	-0.72	-2.07	-0.43
N(CH ₂ CH ₂ CH ₃) ₂	-0.26	-0.93		
N(C ₆ H ₅) ₂	0.00	-0.22		
N(CH ₃)COCF ₃	0.41	0.39		
N(CH ₃)COCH ₃	0.31	0.26		
N(CH ₃)NO ₂	0.49	0.61		
N=CCl ₂	0.21	0.13		
N(CF ₃) ₂	0.40	0.53		0.53
N=C=O	0.27	0.19	-0.19	
N(C(O)CH ₃) ₂	0.35	0.33		
N=C=S	0.48	0.38		0.34
NH ₂	-0.16	-0.66	-1.3	-0.15
NH ₃ ⁺	0.86	0.60		-0.56
NHCH ₃	-0.21	-0.70	-1.81	
NHCH ₂ CH ₃	-0.24	-0.61		

Заместитель	σ_m	σ_p	σ_p^+	σ_p^-
$\text{NH}(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	-0.34	-0.51		
NHC_6H_5	-0.02	-0.56	-1.4	-0.29
NHCHO	0.19	0.00		
NHCN	0.21	0.06		
NHCOCF_3	0.30	0.12		
NHCOCH_3	0.21	0	-0.6	-0.46
$\text{NHCOCH}(\text{CH}_3)_2$	0.11	-0.10		
NHCOC_6H_5	0.02	-0.19	-0.6	
NHCONH_2	-0.03	-0.24		
$\text{NHCONHCH}_2\text{CH}_3$	0.04	-0.26		
$\text{NHCOOCH}_2\text{CH}_3$	0.11	-0.15		
$\text{NHCOO}(\text{CH}_2)_3\text{CH}_3$	0.06	-0.05		
NHCSNH_2	0.22	0.16		
$\text{NHCSNHCH}_2\text{CH}_3$	0.30	0.07		
NHNH_2	-0.02	-0.55		
NHNO_2	0.91	0.57		
NHOH	-0.04	-0.34		
NHSO_2CF_3	0.44	0.39		
NHSO_2CH_3	0.20	0.03		
$\text{N}\equiv\text{N}^+$	1.76	1.91		3.43
$\text{N}\equiv\text{N}^+(\text{BF}_4^-)$	1.65	1.79		
$\text{N}=\text{NCF}_3$	0.56	0.68		
$\text{N}=\text{NC}_6\text{H}_5$	0.32	0.39		
$\text{N}=\text{NCN}$	0.71	1.03		
NNO_2^-	0.00	-0.43		
NO	0.62	0.91		1.63
NO_2	0.71	0.78	0.79	1.27
$\text{N}(\text{O})=\text{NCN}$	0.78	0.89		

Заместитель	σ_m	σ_p	σ_p^+	σ_p^-
N ₃	0.37	0.08		0.11
O ⁻	-0.47	-0.81	-2.3	-0.82
CCl ₃	0.43	0.35		
OCF ₃	0.38	0.35		
OCH ₃	0.12	-0.27	-0.78	-0.26
OCH=CH ₂	0.21	-0.09		
OCH ₂ CH ₃	0.10	-0.24	-0.81	-0.28
O(CH ₂) ₃ CH ₃	0.10	-0.32		
OC ₆ H ₅	0.25	-0.03	-0.5	-0.1
OCN	0.67	0.54		
OC(O)CF ₃	0.56	0.46		
OC(O)CH ₃	0.38	0.50	-0.19	
OH	0.12	-0.37	-0.92	-0.37
ONO ₂	0.55	0.70		
OPO ₃ H ⁻	0.29	0.00		
OSi(CH ₃) ₃	0.13	-0.27		
OS(O)CH ₃	0.44	0.45		
OSO ₂ CF ₃	0.56	0.53		0.49
oxiranyl	0.05	0.03		
SH	0.25	0.15	-0.03	
SF ₅	0.61	0.68		0.86
SOCHF ₂	0.54	0.58		0.93
SO ₂ CHF ₂	0.75	0.86		1.44
SiH(CH ₃) ₂	0.01	0.04	-0.04	
Si(CH ₃) ₃	-0.04	-0.07	0.02	
Sn(CH ₃) ₃	0	0	-0.12	

Литература:

1. C. Hansch, A. Leo, R.W. Taft. *Chem. Rev.* **1991**, 91, 165–195.

Таблица 6. Свойства некоторых растворителей

Растворитель	T _{пл} , °C	T _{кип} , °C	ε	μ, Д
Анизол	−3	154	4.33	1.38
Ацетон	−95	56	20.7	2.85
Ацетонитрил	−44	82	37.5	3.45
Бензол	5	80	2.27	0
Бромбензол	−31	156	5.17	1.55
трет–Бутиловый спирт	26	82	10.9	1.66
Вода	0	100	80.1	1.82
Гексаметилфосфортриамид (гексаметапол)	7	235	30	5.54
Дибутиловый эфир	−98	142	3.1	1.18
N,N–Диметилацетамид	−20	166	37.8	3.72
Диметилсульфоксид	19	189	46.7	3.9
N,N–Диметилформамид	−60	152	36.7	3.86
1,2–Диметоксиэтан	−68	85	7.2	1.71
1,4–Диоксан	12	101	2.25	0.45
о–Дихлорбензол	−17	181	9.93	2.27
Дихлорметан	−95	40	8.93	1.55
1,2–Дихлорэтан	−36	84	10.36	1.86
Диэтиламин	−50	56	3.6	0.92
Диэтиловый эфир	−117	35	4.33	1.3
Изопропиловый спирт	−90	82	17.9	1.66
о–Ксилол	−25	144	2.57	0.62
Метанол	−98	65	32.7	1.7
Муравьиная кислота	8	101	58	1.41
Нитробензол	6	211	34.82	4.02
Нитрометан	−28	101	35.87	3.54
Пиридин	−42	115	12.4	2.37

Растворитель	T _{пл} , °C	T _{кип} , °C	ε	μ, Д
Сульфолан	27	285	44	4.68
Тетрагидрофуран	−109	66	7.58	1.75
Тетрахлорметан	−23	77	2.24	0
Толуол	−95	111	2.38	0.43
Трифторуксусная кислота	−15	72	8.55	2.26
2,2,2–Трифторэтанол	−44	77	8.55	2.52
Трихлорэтилен	−86	87	3.4	0.81
Триэтиламин	−115	90	2.42	0.87
Углерода дисульфид	−112	46	2.6	0
Уксусная кислота	17	118	6.15	1.68
Формамид	3	211	111	3.37
Хлорбензол	−46	132	5.62	1.54
Хлороформ	−64	61	4.81	1.15
Циклогексан	6	81	2.02	0
Этанол	−114	78	24.5	1.69
Этилацетат	−84	77	6.02	1.88
Этилбензоат	−35	213	6.02	2

Литература:

1. CRC Handbook of Chemistry and Physics, 95th Edition, Ed. by William M. Hayes. CRC Press. **2014**.

Таблица 7. Данные ^1H ЯМР. Химические сдвиги наиболее часто используемых растворителей

	Протон	mult	CDCl_3	$(\text{CD}_3)_2\text{CO}$	$(\text{CD}_3)_2\text{SO}$	C_6D_6	CD_3CN	CD_3OD	D_2O
Индивидуальный пик растворителя			7.26	2.05	2.50	7.16	1.94	3.31	4.79
H_2O		s	1.56	2.84 ^a	3.33 ^a	0.40	2.13	4.87	–
ацетон	CH_3	s	2.17	2.09	2.09	1.55	2.08	2.15	2.22
ацетонитрил	CH_3	s	2.10	2.05	2.07	1.55	1.96	2.03	2.06
бензол	CH	s	7.36	7.36	7.37	7.15	7.37	7.33	–
трет–бутанол	CH_3	s	1.28	1.18	1.11	1.05	1.16	1.40	1.24
	OH^c	s			4.19	1.55	2.18		
трет–бутил метиловый эфир	CCH_3	s	1.19	1.13	1.11	1.07	1.14	1.15	1.21
	OCH_3	s	3.22	3.13	3.08	3.04	3.13	3.20	3.22
n–гексан	CH_3	t	0.88	0.88	0.86	0.89	0.89	0.90	
	CH_2	m	1.26	1.28	1.25	1.24	1.28	1.29	
ГМФТА ^s	CH_3	d, 9,5	2.65	2.59	2.53	2.40	2.57	2.64	2.61
2,6–диметил–6–трет–бутил фенол	ArH	s	6.98	6.96	6.87	7.05	6.97	6.92	–
	OH^c	s	5.01	–	6.65	4.79	5.20	–	–
	ArCH_3	s	2.27	2.22	2.18	2.24	2.22	2.21	–
	$\text{ArC}(\text{CH}_3)_3$	s	1.43	1.41	1.36	1.38	1.39	1.40	–
1,2–дихлорэтан	CH_2	s	3.73	3.87	3.90	2.90	3.81	3.78	–
дихлорметан	CH_2	s	5.30	5.63	5.76	4.27	5.44	5.49	–
диэтиловый эфир	CH_3	t, 7	1.21	1.11	1.09	1.11	1.12	1.18	1.17
	CH_2	q, 7	3.48	3.41	3.38	3.26	3.42	3.49	3.56
диглим	CH_2	m	3.65	3.56	3.51	3.46	3.53	3.61	3.67
	CH_2	m	3.57	3.47	3.38	3.34	3.45	3.58	3.61
	OCH_3	s	3.39	3.28	3.24	3.11	3.29	3.35	3.37
1,2–диметоксиэтан	CH_3	s	3.40	3.28	3.24	3.12	3.28	3.35	3.37

	Протон	mult	CDCl ₃	(CD ₃) ₂ CO	(CD ₃) ₂ SO	C ₆ D ₆	CD ₃ CN	CD ₃ OD	D ₂ O
	CH ₂	s	3.55	3.46	3.43	3.33	3.45	3.52	3.60
диметилацетамид	CH ₃ CO	s	2.09	1.97	1.96	1.60	1.97	2.07	2.08
	NCH ₃	s	3.02	3.00	2.94	2.57	2.96	3.31	3.06
	NCH ₃	s	2.94	2.83	2.78	2.05	2.83	2.92	2.90
диметилформаид	CH	s	8.02	7.96	7.95	7.63	7.92	7.97	7.92
	CH ₃	s	2.96	2.94	2.89	2.36	2.89	2.99	3.01
диметилсульфоксид	CH ₃	s	2.62	2.52	2.54	1.68	2.50	2.65	2.71
диоксан	CH ₂	s	3.71	3.59	3.57	3.35	3.60	3.66	3.75
метанол	CH ₃	s ^h	3.49	3.31	3.16	3.07	3.28	3.34	3.34
	OH	s ^{c, h}	1.09	3.12	4.01		2.16		
нитрометан	CH ₃	s	4.33	4.43	4.42	2.94	4.31	4.34	4.40
n-пентан	CH ₃	t, 7	0.88	0.88	0.86	0.87	0.89	0.90	
	CH ₂	m	1.27	1.27	1.27	1.23	1.29	1.29	
2-пропанол	CH ₃	d, 6	1.22	1.10	1.04	0.95	1.09	1.50	1.17
	CH	sep, 6	4.04	3.90	3.78	3.67	3.87	3.92	4.02
пиридин	CH(2)	m	8.62	8.58	8.58	8.53	8.57	8.53	8.52
	CH(3)	m	7.29	7.35	7.39	6.66	7.33	7.44	7.45
	CH(4)	m	7.68	7.76	7.79	6.98	7.73	7.85	7.87
смазка f	CH ₃	m	0.86	0.87		0.92	0.86	0.88	
	CH ₂	br s	1.26	1.29		1.36	1.27	1.29	
силиконовая смазка	CH ₃	s	0.07	0.13		0.29	0.08	0.10	
тетрагидрофуран	CH ₂	m	1.85	1.79	1.76	1.40	1.80	1.87	1.88
	CH ₂ O	m	3.76	3.63	3.60	3.57	3.64	3.71	3.74
толуол	CH ₃	s	2.36	2.32	2.30	2.11	2.33	2.32	
	CH(o/p)	m	7.17	7.1–7.2	7.18	7.02	7.1–7.3	7.16	
	CH(m)	m	7.25	7.1–7.2	7.25	7.13	7.1–7.3	7.16	
триэтиламин	CH ₃	t, 7	1.03	0.96	0.93	0.96	0.96	1.05	0.99
	CH ₂	q, 7	2.53	2.45	2.43	2.40	2.45	2.58	2.57
уксусная кислота	CH ₃	s	2.10	1.96	1.91	1.55	1.96	1.99	2.08
хлороформ	CH	s	7.26	8.02	8.32	6.15	7.58	7.90	–
циклогексан	CH ₂	s	1.43	1.43	1.40	1.40	1.44	1.45	–
этанол	CH ₃	t, 7	1.25	1.12	1.06	0.96	1.12	1.19	1.17
	CH ₂	q, 7 ^d	3.72	3.57	3.44	3.34	3.54	3.60	3.65

	Протон	mult	CDCl ₃	(CD ₃) ₂ CO	(CD ₃) ₂ SO	C ₆ D ₆	CD ₃ CN	CD ₃ OD	D ₂ O
	ОН	s ^{c, d}	1.32	3.39	4.63	—	2.47	—	—
этилацетат	CH ₃ CO	s	2.05	1.97	1.99	1.65	1.97	2.01	2.07
	CH ₂ CH ₃	q, 7	4.12	4.05	4.03	3.89	4.06	4.09	4.14
	CH ₂ CH ₃	t, 7	1.26	1.20	1.17	0.92	1.20	1.24	1.24
этилметилкетон	CH ₃ CO	s	2.14	2.07	2.07	1.58	2.06	2.12	2.19
	CH ₂ CH ₃	q, 7	2.46	2.45	2.43	1.81	2.43	2.50	3.18
	CH ₂ CH ₃	t, 7	1.06	0.96	0.91	0.85	0.96	1.01	1.26
этиленгликоль	CH	s ^e	3.76	3.28	3.34	3.41	3.51	3.59	3.65

a В этих растворителях обмен протоном происходит достаточно медленно, поэтому обычно наблюдаются пики соответствующие HDO: при 2.81 и 3.30 м.д. В ацетоне и ДМСО соответственно. В таких растворителях часто можно увидеть триплет 1:1:1 с константой спин-спинового взаимодействия $^2J_{H,D} = 1$ Hz.

b 2,6-диметил-4-*t*-бутилфенол.

c Сигналы обменивающихся протонов наблюдаются не всегда.

d В некоторых случаях (смотри ссылку a), взаимодействие между протонами CH₂ и ОН может наблюдаться (J = 5 Hz).

e В CD₃CN, протон ОН-группы наблюдается как мультиплет d = 2.69, и дополнительное взаимодействие проявляется и на метиленовом сигнале.

f Тяжелые линейные алифатические углеводороды. Их растворимость в ДМСО слишком низкая, чтобы наблюдались сигналы.

g Гексаметилфосфортриамид.

h В некоторых случаях (смотри ссылки a, d), спин-спиновое взаимодействие между протонами CH₃ и ОН групп может наблюдаться (J = 5.5 Hz).

j Поли(диметилсилоксан). Его растворимость в ДМСО слишком низкая, чтобы наблюдались сигналы.

Литература:

1. Hugo E. Gottlieb, Vadim Kotlyar, and Abraham Nudelman. *J. Org. Chem.*, **1997**, 62 (21), 7512–7515.

Справочное издание

Бокач Надежда Арсентьевна
Боярский Вадим Павлович
Мильцов Сергей Александрович
Толстой Петр Михайлович
Чулкова Татьяна Геннадьевна

Теоретические основы
органической химии
Справочные таблицы

Компьютерная верстка: *Мещерин В. В.*

Издательство ВВМ
190000, Санкт-Петербург, ул. Декабристов, д. 6, литер А, пом. 10-н

Подписано в печать 28.10.2015. Формат 60 × 84^{1/16}.
Бумага офсетная. Гарнитура Times. Печать цифровая.
Усл. печ. л. 2,03. Тираж 100 экз. Заказ № 132.

Отпечатано в Издательстве ВВМ .
198095, Санкт-Петербург, ул. Швецова, 41.
Тел. 8-901-306-62-54